

АНАЛИЗ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Викладено метод аналізу процесів тепло- і масопереносу в багатоконпонентному середовищі, ґрунтуючись на принципах нерівноважної термодинаміки.

A method for analyzing processes of heat and mass transfer in a multicomponent medium, based on the principles of nonequilibrium thermodynamics.

Постановка задачи, результаты исследования

Рассмотрим газовую смесь, состоящую из N компонентов. Макроскопическая смесь представляется как один континуум, характеризуемый системой переменных состояний, к которым в первую очередь можно отнести среднemasсовую плотность $\rho(r, t)$, температуру $T(r, t)$, термодинамическое давление $p(r, t)$ и числовые плотности $n_\alpha(r, t)$, где $\alpha = 1, 2, \dots, N$, компонентов смеси. Переменные состояния являются функциями времени t и пространственных координат x, y, z .

Уравнение субстанционального баланса для каждого определяющего параметра смеси $A(r, t)$, т.е. параметра, характеризующего состояния сплошной среды, ее динамику, в том числе, мгновенное состояние турбулизованной смеси, может быть записано в следующем общем виде [1]:

$$\rho \frac{dA}{dt} = -I_{(A)}(r, t) + \sigma_{(A)}, \quad (1)$$

где $\rho(r, t)$ — суммарная массовая плотность смеси; A — удельное (локальное) значение конкретной скалярной величины (например, массы, энергии, энтропии и пр.), баланс которой составляется; $I_{(A)}(r, t)$ — составляющие вектора субстанциональной плотности молекулярного потока параметра A (суммарная величина всех видов переноса параметра A через единицу поверхности, включающая конвективную составляющую $\rho A V_j$, где V_j — гидродинамическая (среднемассовая) скорость многокомпонентного континуума; $\rho_{(A)}(r, t)$ — объемная плотность параметра A .

Параметр A является скаляром, декартовой компонентой вектора или тензора, соответствующим в случае турбулентного течения мгновенному значению нулевой величины произвольного тензорного ранга. Скорость образования $\sigma_{(A)}$ представляет собой тензор того же порядка, что и характеристика A , а поток $I_{(A)}$ — тензор на один порядок выше.

Существенным является принятие положения о сохранении полной массы в произвольном элементе объема системы при ее движении, т.е. тот факт, что масса может изменяться только в том случае, когда вещество втекает в элемент объема системы или вытекает из него.

Гидродинамические уравнения многокомпонентной среды должны быть дополнены начальными и граничными

условиями, а также соответствующими выражениями для источниковых составляющих (например, в уравнениях диффузии химических компонентов), для определяющих соотношений, которые связывают тензор вязких напряжений A_{ij} , тепловой поток q_j и потоки диффузии $I_{\alpha j}$ с градиентами термогидродинамических параметров среды (массовой плотности, скорости, температуры и концентраций химических компонентов). В зависимости от постановки задачи необходимо включить выражение для вектора радиационного потока тепла q_{Rj} .

В развитых турбулентных течениях многокомпонентных газов в общем случае протекают явления диффузии, теплопроводности, термодиффузии, вязкости. В каждое из уравнений, описывающих указанные процессы, входит дивергенция потока некоторой величины, связанной с градиентами термогидродинамических параметров (так называемыми термодинамическими силами). В последние десятилетия для получения линейных связей между этими потоками и сопряженными им термодинамическими силами, основываются на макроскопическом, т.е. феноменологическом подходе. Такой метод решения термогидродинамических задач базируется на применении законов механики сплошной среды и неравновесной термодинамики.

В линейной неравновесной термодинамике в качестве определяющих (реологических) соотношений используются феноменологические соотношения необратимых процессов, известных как соотношения Онзагера [1–4]:

$$I_k = \sum_{k=1}^N L_{kl} X_l, \quad (k = 1, 2, \dots, n), \quad (2)$$

где I_k — поток; N — число независимых физических процессов; L_{kl} — матрица феноменологических (кинетических) коэффициентов, связывающих между собой поток I_k и термодинамические силы X_l .

Потоки и термодинамические силы являются, в общем случае, тензорными величинами любого ранга. Физический смысл кинетических коэффициентов может быть выяснен в рамках молекулярно-кинетической теории [5]. Число отличных от нуля коэффициентов в (1) ограничивается принципом Кюри [2], согласно которому в силу свойств симметрии рассматриваемой материальной сре-

ды компоненти потоков будут зависеть не от всех компонентов термодинамических сил. Так, в случае изолированной системы процессы равной тензорной размерности не взаимодействуют друг с другом.

В рамках соотношения Онзагера принимаются в качестве независимого постулата соотношения симметрии Онзагера—Казимира. Для изотропной невращающейся системы в отсутствии внешнего магнитного поля соотношение симметрии имеет вид [2]:

$$L_{ki} = L_{ik}, \quad (3)$$

где L_{ki} — скалярные величины.

Соотношения (2) и (3) принимаются как эмпирическая аксиома, но находят подтверждение в рамках статистической механики [6] и экспериментальными данными [7].

Скорость производства энтропии $\sigma_{(s)}$ внутри системы в рассматриваемом необратимом процессе представляется в билинейной форме [2]:

$$T\sigma_{(s)} = \sum_{k=1}^N I_k X_k \geq 0. \quad (4)$$

Эту зависимость можно записать в виде уравнения эволюции энтропии S непрерывной системы

$$\rho \, dS/dt = I_{(s)} + \sigma_{(s)}, \quad (5)$$

где $\sigma_{(s)} \geq 0$; $I_{(s)}$ — составляющие вектора субстанциональной плотности потока энтропии. При том $I_{(s)}$ описывает обратимый теплообмен между рассматриваемой системой и окружающей средой, а неравенство $\sigma_{(s)} \geq 0$ подчеркивает, что энтропия замкнутой системы не может уменьшаться.

Принимая во внимание принцип квазилокального равновесия, являющийся основным постулатом неравновесной термодинамики, всю систему можно разбить на малые макроскопические области, каждую из которых можно рассматривать как равновесную (или квазиравновесную). Принимая в качестве переменных состояния смеси удельную плотность внутренней энергии, удельный объем и удельные концентрации различных химических компонентов, термодинамическое состояние физически элементарного объема в момент времени t полностью описывается удельной энтропией, для которой справедливо известное тождество Гиббса.

Следует заметить, что из гипотезы о локальном равновесии среды следует допущение о справедливости не только соотношения Гиббса, но и других термостатических соотношений для бесконечно малых областей неравновесных систем, к примеру, соотношение Гиббса—Дюгена, используемое при анализе термодинамики многокомпонентных систем:

$$\rho \sum_{\alpha=1}^N Z_{\alpha} d\mu_{\alpha} = -\rho SdT + dp, \quad (6)$$

где ρ — плотность; $\alpha = 1, 2, \dots, N$ — вид компонента смеси; $Z_{\alpha}(r, t) = n_{\alpha}/r$ — удельная (на единицу массы суммарного континуума) числовая плотность α -компоненты; n_{α} — числовая плотность (на единицу объема) молекулы компонента α ; S — энтропия; T — температура; p — давление; μ_{α} — химический потенциал компонента α .

Выражение для субстанциональной плотности поток энтропии записывается так:

$$I_{(s,j)} = \frac{1}{T} [q_j - \sum_{\alpha=1}^N \mu_{\alpha} J_{\alpha j}] = \frac{1}{T} [I_{qj} - \sum_{\alpha=1}^N S_{\alpha} I_{\alpha j}], \quad (7)$$

где q_j — молекулярный поток тепла; $I_{\alpha j}$ — диффузионный (молекулярный) поток компоненты; I_{qj} — приведенный поток тепла, равный

$$I_{qj} = q_j - \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} I_{\alpha j}, \quad (8)$$

где h_{α} — энтальпия компоненты α .

В состояниях, близких к состоянию термодинамического равновесия термодинамические потоки можно представить в виде линейных функций от термодинамических сил:

$$I_{qj} = L_{q\alpha}^{jk} X_{\alpha k} - \sum_{\beta=1}^N L_{\alpha\beta}^{jk} X_{\beta k}, \quad (9)$$

$$I_{\alpha j} = L_{\alpha\omega}^{jk} X_{\omega k} - \sum_{\beta=1}^N L_{\alpha\beta}^{jk} X_{\beta k}, \quad (\alpha, \beta = 0, 1, \dots, N).$$

Кинетические коэффициенты $L_{\alpha\beta}^{jk}$ представляют собой тензоры, зависящие от переменных состояний и параметров, характеризующих геометрическую симметрию среды.

Изложенный феноменологический подход неравновесной термодинамики может быть в полной мере применен к турбулизованному многокомпонентному континууму [8].

Выводы

В заключение можно сделать вывод, что феноменологический подход, основанный на методах неравновесной термодинамики, позволяет сформулировать определяющие соотношения для гидродинамических и тепловых потоков, а также получить удобные для решения алгебраические зависимости, связывающие между собой различные коэффициенты молекулярного переноса.

Литература

1. Дьярмати, И. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1974. — 304 с.
2. Де Гроот, С., Мазур, П. Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.
3. Пригожин, И. Введение в термодинамику необратимых процессов. — М.: Иностранная литература, 1960. — 360 с.
4. Эткин, В.А. Термодинамика неравновесных процессов переноса и преобразования энергии. — Саратов: Изд-во Саратовского университета, 1991. — 168 с.
5. Ферцигер, Дж., Капер, Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: ИЛ, 1976. — 554 с.
6. Miller, D.G. The Onsager relations. Experimental evidence // In Foundations of continuum thermodynamics. — London and Basinstoke Mac-Millan. — 1974.
7. Mason, E.A. The Onsager reciprocal relations. Experimental evidence // In Foundations of continuum thermodynamics. — London and Basinstoke Mac-Millan. — 1974.
8. Колесниченко, А.В. Методы механики сплошной среды для описания турбулентных многокомпонентных смесей с химическими реакциями и процессами тепломассопереноса // Труды V Всесоюзного съезда по теоретической и прикладной механике. — М.: Алма-Ата, 1981. — С. 123—126.

Надійшла 28.09.2010 р.